

Title	6. Au(111)のsurface reconstructionとLAPW法による一枚フィルムバンド計算(大阪大学理学研究科物理学専攻,修士論文アブストラクト(1980年度))
Author(s)	川上, 和人
Citation	物性研究 (1981), 36(3): 191-191
Issue Date	1981-06-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/90315
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

下降した。この測定により、磁性不純物を入れる事により H_{c2} が高くなり得るという Peter-Jaccarino model は、少なくともこの系では成立しない事が明らかになった。

5. シアニン色素TCNQ錯体の ESR

植 村 壽 公

シアニン色素の一種 1-Methyl-3'-ethyl-2,2'-quinoselenacyanine と TCNQ との 1 : 2 錯塩について、4.2 ~ 290 K での帯磁率及び ESR 測定を行った。今回の研究によって、この物質は温度を変えることにより低温 (30 ~ 65 K) では spin pair として、中間温度 (65 ~ 160 K) では 1 次元的、そして高温 (160 ~ 290 K) では 2 次元又は 3 次元的挙動をするという面白い性質が明らかとなった。低温では観測される ESR は two spin pair model を考えることにより説明される。中間温度では線巾、線型とも 1 次元磁性体の振まいを示す。高温では 1 次元とは異なり chain 間の相互作用を無視できない角度変化が観測された。帯磁率および電気伝導度の結果ともあわせて議論する。

6. Au (111) の surface reconstruction と LAPW 法による一枚フィルムのバンド計算

川 上 和 人

Au (111) 表面は、低温で $\langle 110 \rangle$ 方向に、高温で等方的に縮んだ incommensurate な reconstruction が現われる。これは、表面では固体内部よりも原子間隔が縮まろうとする傾向にあることで現象論的に説明できると考えられる。そこで表面の一層に着目し、第一段階として一枚のフィルムのバンド計算を LAPW を用いて行なった。